



**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Направление подготовки/профиль 18.06.01 – «Химическая технология» / 05.17.08 – «Процессы и аппараты химических технологий»
Инженерная школа природных ресурсов
Отделение Химической инженерии

**Научный доклад об основных результатах подготовленной научно-квалификационной
работы**

Тема научного доклада
Повышение эффективности процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами с применением математической модели

УДК 665.652.4.094.522:519.876

Аспирант

Группа	ФИО	Подпись	Дата
A4-52	Нурмаканова Асем Еслямбековна		

Руководитель профиля подготовки

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Белинская Н.С.	К.Т.Н.		

Руководитель отделения

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОХИ ИШПР	Короткова Е.И.	д.х.н., профессор		

Научный руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОХИ ИШПР	Ивашкина Елена Николаевна	д.т.н., доцент		

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы

В связи с ужесточением требований к моторным топливам ежегодно растет спрос на алкилат – продукт процесса алкилирования изобутана олефинами, состоящий из разветвленных углеводородов, которые обладают высоким октановым числом. В связи с этим оптимизация процесса алкилирования на сегодняшний день является актуальной задачей. Для этой цели успешно применяется метод математического моделирования, использующий большой массив данных в интервале параметров, допустимом технологическим режимом. Несмотря на активные разработки в области твердокислотного катализа, в промышленности алкилирование изобутана олефинами в основном проводится с использованием серной или фтористоводородной кислоты. Таким образом, работа в области моделирования процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами является актуальной.

Объект исследования: реакторный блок установки сернокислотного алкилирования изобутана олефинами.

Предмет исследования: закономерности процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами.

Цель работы заключается в увеличении выхода изоалканов и повышении качества производимого алкилата путем оптимизации режимов работы реактора сернокислотного алкилирования изобутана олефинами с использованием метода математического моделирования.

Для достижения цели исследования определены следующие **задачи**:

1. Исследование процесса и определение зависимости выхода целевого продукта и его октанового числа от состава сырьевой смеси и технологических параметров.
2. Термодинамический анализ реакций, протекающих в процессе алкилирования изобутана олефинами, определение термодинамических параметров переходного состояния для создания кинетической модели.

3. Составление схемы реакций процесса алкилирования изобутана олефинами, а также ее формализация.

4. Разработка математической модели процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами.

5. Оптимизация технологического режима работы реактора сернокислотного алкилирования.

Научная новизна

1. Установлено, что максимально возможная концентрация целевых продуктов в промышленном процессе сернокислотного алкилирования изобутана олефинами достигается повышением расхода изобутана в реакционной смеси для снижения содержания примесей, а также пропилена в олефиновом сырье.

2. Установлено, что формализация схемы превращений углеводородов в процессе сернокислотного алкилирования изобутана олефинами, включающая 19 реакций, обеспечивает адекватность кинетического описания протекающих реакций в широком диапазоне технологических параметров.

3. Установлено, что при повышении соотношения изобутана к олефинам с 10 до 13 октановое число получаемого алкилата возрастает на 0,8-1,0 пункт при прочих равных условиях.

Положения, выносимые на защиту

1. Положение об уровне детализации схемы реакций углеводородов, которая включает 19 реакций и обеспечивает адекватность разрабатываемой модели, что, в свою очередь, обеспечивает прогнозирование оптимальные режимы работы реактора.

2. Положения о термодинамических и кинетических параметрах химических превращений, протекающих в процессе сернокислотного алкилирования изобутана олефинами.

По теме диссертации опубликовано 15 работ, в том числе 2 статьи в журналах из списка ВАК, 2 из которых индексируемые базами Scopus и Web of Science; получено 1 свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении показана актуальность темы диссертационной работы и сформулированы ее цель и задачи.

В первой главе приводится обзор литературных данных, посвященный истории развития процесса алкилирования изобутана олефинами.

Во второй главе описаны объект и предмет исследования, технологическая схема исследуемого процесса, а также методы, применяемые при создании математической модели.

Объектом исследования данной работы является процесс серноокислотного алкилирования изобутана олефинами. Предметом исследования – процессы серноокислотного алкилирования изобутана олефинами, протекающие в промышленном реакторном блоке.

В качестве исходных материалов были взяты экспериментальные данные с промышленной установки производства алкилата на АО «Газпромнефть-ОНПЗ».

Для расчета термодинамических параметров веществ были использованы квантово-химические методы.

В третьей главе описан химизм процесса алкилирования, этапы построения математической модели.

При построении математической модели был составлен список возможных реакций, протекающих в процессе алкилирования изобутана олефинами на основе литературных данных. Выполнены расчеты энтальпии, энергии Гиббса и энтропии основных реакций процесса серноокислотного алкилирования изобутана олефинами при условиях проведения его в промышленности. На основании термодинамической вероятности реакций, протекающих в реакторах серноокислотного алкилирования, была составлена формализованная схема превращений веществ процесса взаимодействия изобутана олефинами, а также рассчитаны кинетические параметры реакций: энергия активации (E_a) и предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса (k_0). Решением обратной кинетической зависимости была составлена кинетическая модель

процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами. После чего модель была программно реализована на языке программирования Object Pascal.

В четвертой главе описана оптимизация процесса сернокислотного алкилирования с применением разработанной математической модели.

Разработанная математическая модель была использована для численных исследований по количественной оценке влияния технологического режима на ключевые показатели процесса получения алкилбензина с целью оптимизации.

В результате работы было установлено, что:

1. Предложенный уровень детализации схемы химических реакций, включающей 19 реакций, а также учитывающий образование высокомолекулярных соединений, нестационарность процесса обеспечивает универсальность и адекватность кинетического описания протекающих реакций и позволяет сохранить чувствительность математической модели процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами.
2. Результаты термодинамического анализа подтверждают, что все реакции, протекающие в реакторе алкилирования изобутана олефинами, обратимые. Реакции получения целевых продуктов имеют более высокие значения предэкспоненциальных множителей ($1,10 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$ - $2,09 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$) и низкие значения энергий активаций (60,17 кДж/моль - 67,03 кДж/моль), и, соответственно, протекают с большей скоростью.
3. Разработанная математическая модель процесса алкилирования изобутана олефинами позволяет количественно оценить возможность нивелирования влияния примесей на выход алкилата за счет увеличения расхода изобутановой фракции. Повышение концентрации изобутана в реакционной смеси на 1 % масс. приводит к снижению массовой доли высокомолекулярных соединений в продукте в среднем на 0,4 %.
4. Разработанная модель позволяет рассчитать необходимый расход «свежей» кислоты для поддержания требуемого содержания высокомолекулярных соединений в продукте ниже 4%. При повышении концентрации серной кислоты в реакторе на 1% мас, октановое число алкилата на 0,5 пункта.